

Восстановление комплексного коэффициента отражения по алгоритму опорного слоя для многослойных систем с неколлинеарным магнитным упорядочением*

Ю. А. Саламатов, Е. С. Никова, Д. И. Девятериков, Е. А. Кравцов

Институт физики металлов имени М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, Российская Федерация, 620137, Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, 18

Для цитирования: Саламатов Ю. А., Никова Е. С., Девятериков Д. И., Кравцов Е. А. Восстановление комплексного коэффициента отражения по алгоритму опорного слоя для многослойных систем с неколлинеарным магнитным упорядочением // Вестник Санкт-Петербургского университета. Прикладная математика. Информатика. Процессы управления. 2022. Т. 18. Вып. 4. С. 583–595. <https://doi.org/10.21638/11701/spbu10.2022.412>

В работе анализируются два математических алгоритма обработки экспериментальных кривых в рефлектометрии поляризованных нейтронов, один из которых позволяет определить комплексный коэффициент отражения нейтронов от многослойных магнитных наноструктур. Апробация проведена для сверхрешетки Fe/Cr с нерегулярным неколлинеарным упорядочением магнитных моментов слоев Fe. Обработка эксперимента производилась как прямым уточнением параметров структуры, так и методом восстановления модуля и фазы рефлектометрического сигнала с использованием опорного слоя Gd, результаты сравниваются между собой. Для уточнения структурных и магнитных характеристик в обоих случаях был применен алгоритм Левенберга — Марквардта. Полученные сведения о магнитной структуре соответствуют теоретической модели перемангничивания слоистого искусственного антиферромагнетика конечных размеров в малых полях. Представленная модификация метода опорного слоя может считаться решением фазовой проблемы в рефлектометрии поляризованных нейтронов.

Ключевые слова: рефлектометрия поляризованных нейтронов, метод фазово-амплитудных функций, метод Рунге — Кутты, комплексный коэффициент отражения, многослойные наногетероструктуры, фазовая проблема, неколлинеарное магнитное упорядочение, опорный слой, алгоритм Левенберга — Марквардта.

1. Введение. Многослойные металлические наноструктуры, образованные чередующимися слоями магнитного и неферромагнитного металлов, например Fe и Cr, привлекли внимание исследователей с момента открытия в 1988 г. в них осциллирующего с толщиной прослойки Cr межслойного обменного взаимодействия и гигантского магниторезистивного эффекта [1, 2]. Они оказались очень удобными объектами для изучения низкоразмерного магнетизма как теоретическими, так и экспериментальными методами. Существуют и другие типы слоистых структур, например тонкие органические полупроводниковые пленки, наносимые на диэлектрические подложки. Они демонстрируют интересные фотохимические и фотоэлектронные свойства, есть работы по расчетам их характеристик [3].

* Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема «Спин» № 22021000036-3), нейтронографические исследования — при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Соглашения № 075-15-2022-830 от 27 мая 2022 г. (продолжение Соглашения № 075-15-2021-1358 от 12 октября 2021 г).

© Санкт-Петербургский государственный университет, 2022

Наибольший интерес представляют пленки с такой толщиной прослойки Cr, когда магнитные моменты слоев железа в отсутствие внешнего поля упорядочиваются антипараллельным образом, формируя так называемый слоистый антиферромагнетик. В достаточно сильном внешнем поле — поле насыщения — магнитные моменты всех слоев железа выстроятся строго ферромагнитно. Но при промежуточных полях могут возникать нетривиальные магнитные конфигурации, что связано с действием ряда конкурирующих механизмов. Ими являются собственно внешнее поле, межслойное обменное взаимодействие антиферромагнитного типа, кристаллическая анизотропия и влияние поверхности. Теоретический анализ поведения слоистого антиферромагнетика во внешнем поле с учетом этих механизмов представлен в работе [4], для ряда случаев выведены конфигурации магнитных моментов.

Прямым методом определения магнитных конфигураций в таких металлических наноструктурах с разрешением по глубине является рефлектометрия поляризованных нейтронов. Данный метод основан на анализе коэффициента зеркального отражения поляризованных нейтронов, падающих под малыми углами скольжения к поверхности наноструктуры. Обработав зависимость нейтронной рефлектометрической кривой от переданного импульса и спина, можно построить глубинные профили рассеивающего ядерного и магнитного потенциалов. К слабым местам относится невозможность однозначного восстановления рассеивающего потенциала, так как в процессе измерения регистрируется только амплитуда и теряется информация о фазе рассеянной нейтронной волны. Это хорошо известная фазовая проблема в теории рассеяния, для экспериментального решения которой будем использовать метод опорного слоя.

Для этого исследуем сверхрешетки Fe/Cr, в которых были получены экспериментальные свидетельства существования таких неоднородных конфигураций методом поляризационной нейтронной рефлектометрии [5], причем анализ проводился методом подгонки теоретических кривых к экспериментальным. Было показано, что в сверхрешетке $^{57}\text{Fe}/\text{Cr}$ во внешнем магнитном поле 195 Э наблюдалось неоднородное упорядочение магнитных моментов веерного типа с переменным углом отклонения от направления поля. Кроме того, магнитная структура разбивается на латеральные домены двух типов.

В настоящей работе для сверхрешетки Fe/Cr была получена рефлектометрическая картина, подобная той, что наблюдалась в [5], хотя внешнее поле было примерно в 8 раз слабее (24 Э). Последнее говорит о том, что слабое неколлинеарное упорядочение может возникать в слоистых антиферромагнетиках уже в достаточно малых внешних полях. В п. 5 приведены экспериментальные результаты по поляризационной нейтронной рефлектометрии и их анализ при стандартном подходе и с применением метода опорного слоя, проведенный с целью уточнения характеристик возникшего в сверхрешетке упорядочения магнитных слоев.

2. Теория метода фазово-амплитудных функций. В основе метода лежит представление о так называемой фазовой функции $\alpha(r)$, которая имеет простой и наглядный физический смысл [6]. При заданном центральном потенциале значение этой функции в некоторой точке r является фазой рассеяния на части потенциала взаимодействия, заключенного в сфере радиуса r . Фаза рассеяния α на всем потенциальном барьере определяется как предел $\alpha = \lim_{r \rightarrow \infty} \alpha(r)$. Фазовая функция удовлетворяет дифференциальному уравнению Риккати, которое называется фазовым уравнением. Фазовая функция характеризует эффект действия потенциала и равна нулю, если равен нулю потенциал.

Задача описания отражения нейтронов от металлических пленок является вариантом одномерной задачи о взаимодействии частицы с потенциальным барьером (ядерной или магнитной структурой отражающего слоя). Волновое уравнение в этом случае имеет вид

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + [k^2 - V(x)]\psi(x) = 0. \quad (1)$$

Волновая функция рассматривается как суперпозиция падающей и отраженной волн:

$$\psi(x) = A(x)[e^{ikx} + B(x)e^{-ikx}]. \quad (2)$$

Подставляя выражение (2) в уравнение (1) и проведя преобразования [6], можно получить уравнение для амплитуды отраженной волны $B(x)$, имеющее форму фазового уравнения:

$$\frac{d}{dx}B(x) = -\frac{1}{2ik}V(x)[e^{ikx} + B(x)e^{-ikx}]^2. \quad (3)$$

В случае рефлектометрии в уравнении (3) $k = \frac{2\pi}{\lambda} \sin \theta$, где θ — угол скольжения, отсчитанный от поверхности пленки, λ — длина волны нейтронов. Вводя обозначение $k_0 = \frac{2\pi}{\lambda}$, получим $k = k_0 \sin \theta$. В рефлектометрии также часто используют величину $q = 2k$, которая имеет смысл переданного импульса при отражении. В дальнейшем будем применять именно такую нотацию.

В отличие от ядерного рассеяния нейтронов взаимодействие поляризованных нейтронов с магнитными моментами атомов — более сложная задача многоканального рассеяния. Возникают два канала рассеяния — для нейтронов со спином «вверх» и для нейтронов со спином «вниз» (направления выбраны условно). Для упрощения дальнейших выкладок введем обозначения: канал нейтронов со спином «вверх» обозначим знаком «+», канал нейтронов со спином «вниз» — знаком «-». Кроме того, каналы являются взаимодействующими — нейтроны могут изменить направление спина в момент рассеяния на образце.

В результате имеем четыре различных в общем случае коэффициента отражения: два основных, без изменения состояния («++» и «--»), и два с изменением состояния («+-» и «-+»). Из-за наличия взаимодействия каналов невозможно получить независимые уравнения для каждого коэффициента отражения. Фазовое уравнение принимает матричный вид, хотя схема его вывода аналогична описанной выше:

$$\frac{d}{dx}\mathbf{B} = (\mathbf{E}^+ + \mathbf{B}\mathbf{E}^-)\mathbf{V}(\mathbf{E}^+ + \mathbf{B}\mathbf{E}^-), \quad (4)$$

где \mathbf{B} — матрица коэффициентов отражения, каждый элемент которой является коэффициентом отражения в определенном канале рассеяния и представляет собой функцию глубины x и волнового числа k :

$$\mathbf{B} \equiv \begin{pmatrix} B_{++}(x, k) & B_{+-}(x, k) \\ B_{-+}(x, k) & B_{--}(x, k) \end{pmatrix}.$$

Матрица \mathbf{V} описывает потенциал взаимодействия в каждом канале:

$$\mathbf{V} \equiv \begin{pmatrix} V_{++}(x, k) & V_{+-}(x, k) \\ V_{-+}(x, k) & V_{--}(x, k) \end{pmatrix}.$$

Чаще всего потенциал взаимодействия — функция только глубины. Но для некоторых веществ, ядра которых резонансно взаимодействуют с тепловыми нейтронами, может

возникнуть зависимость потенциала от длины волны и, следовательно, от волнового числа. Примером такого вещества является гадолиний.

Матрицы \mathbf{E}^+ и \mathbf{E}^- связаны с падающей и отраженной волнами соответственно:

$$\mathbf{E}^+ \equiv \begin{pmatrix} \frac{e^{ikx}}{\sqrt{-2ik}} & 0 \\ 0 & \frac{e^{ikx}}{\sqrt{-2ik}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{E}^- \equiv \begin{pmatrix} \frac{e^{-ikx}}{\sqrt{-2ik}} & 0 \\ 0 & \frac{e^{-ikx}}{\sqrt{-2ik}} \end{pmatrix}.$$

Здесь i — мнимая единица. Все произведения в уравнении (4) являются матричными и в общем случае некоммутативны.

Введем следующие обозначения:

$$\begin{aligned} \delta_n(x, k) &= \Re[N(x)b_n(x, k)], \\ \beta_n(x, k) &= \Im[N(x)b_n(x, k)], \end{aligned}$$

где $b_n(x, k)$ — длина ядерного рассеяния нейтронов с энергией k на глубине x ; $N(x)$ — число частиц в единице объема на глубине x . Величина $\delta_n(x, k)$ описывает преломление и отражение нейтронов в веществе, $\beta_n(x, k)$ — поглощение.

Для магнитного рассеяния имеем, что

$$\begin{aligned} \delta_m(x) &= \mu(x)N(x)b_m(x), \\ \beta_m(x) &= 0. \end{aligned} \tag{5}$$

В (5) $b_m(x)$ — длина магнитного рассеяния нейтронов, $\mu(x)$ — магнитный момент частиц на глубине x , выраженный в магнетонах Бора. Мнимая часть длины рассеяния отсутствует, поскольку взаимодействие с магнитной подсистемой не приводит к поглощению нейтронов.

Тогда элементы матрицы потенциала \mathbf{V} могут быть представлены таким образом [7]:

$$\begin{aligned} V_{++}(x, k) &= 4\pi[\delta_n(x, k) + \delta_m(x) \cos \alpha + i\beta_n(x, k)], \\ V_{--}(x, k) &= 4\pi[\delta_n(x, k) - \delta_m(x) \cos \alpha + i\beta_n(x, k)], \\ V_{+-}(x) &= V_{-+}(x) = 4\pi\delta_m(x) \sin \alpha. \end{aligned} \tag{6}$$

В (6) введена величина α — угол между направлением магнитного момента падающих нейтронов и направлением магнитного момента частиц образца. Если в образце неферромагнитное упорядочение, то α различен в разных слоях. В геликоидальных системах с плавным поворотом магнитного момента угол является функцией глубины $\alpha(x)$.

В случае несимметричного взаимодействия каналов рассеяния $V_{+-}(x) \neq V_{-+}(x)$, но в рефлектометрии поляризованных нейтронов такие задачи не рассматриваются.

При определении граничного условия к уравнениям (3), (4) обычно предполагают, что вне образца находится вакуум. В случае рефлектометрии это соответствовало бы изолированным металлическим пленкам, которые слишком тонки, чтобы они могли существовать сами по себе. Их всегда синтезируют на подложках, очень толстых (примерно 10^{-3} м) по сравнению с характерными толщинами пленок (приблизительно 10^{-9} – 10^{-8} м), и их можно рассматривать как полубесконечную среду с одной стороны пленки. Это приводит к тому, что за исследуемой структурой тоже возникает отраженная от подложки волна, и именно ее амплитуда, которая определяется формулой Френеля [8], должна быть взята в качестве граничного условия для уравнений (3), (4). Тогда для некоторого канала рассеяния ij оно примет следующую форму:

$$B_{ij}(0, k) = \frac{k - \sqrt{k^2 - V_{ij}(0, k)}}{k + \sqrt{k^2 - V_{ij}(0, k)}}.$$

Как скалярное уравнение (3), так и матричное (4) могут быть решены методом Рунге — Кутты, характеристики потенциала при решении обратной задачи можно определить при помощи алгоритма Левенберга — Марквардта или иных алгоритмов спуска.

3. Теория метода опорного слоя. Анализируя уравнение Шредингера (1), можно также связать коэффициенты отражения B и прохождения A для всей структуры через оптическую матрицу [7]:

$$\begin{pmatrix} A \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} 1 \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ B \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Полная оптическая матрица \mathbf{M} представляет собой произведение оптических матриц для каждого слоя в образце:

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_N \mathbf{M}_{N-1} \dots \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1 \mathbf{M}_0.$$

Оптическая матрица для слоя j толщиной d_j имеет вид

$$\mathbf{M}_j = \frac{1 + \frac{\kappa_j}{\kappa_{j+1}}}{2} \begin{pmatrix} e^{i\kappa_j \frac{d_j}{2}} & -r_j e^{-i\kappa_j \frac{d_j}{2}} \\ -r_j e^{i\kappa_j \frac{d_j}{2}} & e^{-i\kappa_j \frac{d_j}{2}} \end{pmatrix},$$

где введен коэффициент отражения Френеля от границы между слоями j и $j + 1$:

$$r_j = \frac{\kappa_j - \kappa_{j+1}}{\kappa_j + \kappa_{j+1}}, \quad \kappa_j = \sqrt{k^2 - V_j}.$$

Коэффициенты отражения и прохождения для всей структуры выражаются через элементы полной оптической матрицы из (7):

$$B = -\frac{m_{21}}{m_{22}}, \quad A = m_{11} - \frac{m_{12}m_{21}}{m_{22}}.$$

Пусть образец состоит из двух частей, отражающие свойства которых описываются матрицами \mathbf{G} и \mathbf{H} . Причем на слое G с неизвестной структурой расположен известный опорный слой H . Данную систему можно рассматривать как двухслойную, и полная оптическая матрица $\mathbf{M} = \mathbf{GH}$. Коэффициенты прохождения A и отражения B такого образца определяются соотношением

$$\begin{pmatrix} A \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} 1 \\ B \end{pmatrix} = \mathbf{GH} \begin{pmatrix} 1 \\ B \end{pmatrix}.$$

В этом случае коэффициент отражения B_g неизвестной части образца представляет собой точку в комплексной плоскости, лежащую на окружности радиуса ρ с центром γ [9]:

$$\gamma = \frac{Rh_{22}h_{12}^* - h_{21}h_{11}^*}{Rh_{12}h_{12}^* - h_{11}h_{11}^*}, \quad \rho = \sqrt{R} \frac{|h_{11}h_{22} - h_{12}h_{21}|}{|Rh_{12}h_{12}^* - h_{11}h_{11}^*|}.$$

Здесь h_{ij} — элементы матрицы \mathbf{H} , а $R = \sqrt{BB^*}$ — модуль коэффициента отражения полной системы.

Длина рассеяния нейтронов природным гадолинием существенно зависит от энергии падающих нейтронов и может быть рассчитана теоретически по формуле

Брейга — Вигнера [10]. Также она может быть определена экспериментально из анализа поглощения нейтронов в гадолиниевой пленке [11]. Если известный опорный слой содержит гадолиний, а в неизвестной части образца его нет, то можно провести три эксперимента при трех различных длинах волн первичного пучка (или при трех разных углах падения на времяпролетном рефлектометре). Тогда комплексный коэффициент отражения B_g неизвестной части образца может быть однозначно определен как точка пересечения трех соответствующих окружностей:

$$B_g = \frac{A_1(\gamma_2 - \gamma_3) + A_2(\gamma_3 - \gamma_1) + A_3(\gamma_1 - \gamma_2)}{\gamma_1^*(\gamma_2 - \gamma_3) + \gamma_2^*(\gamma_3 - \gamma_1) + \gamma_3^*(\gamma_1 - \gamma_2)}.$$

Коэффициенты A_i связаны с центром γ_i и радиусом ρ_i соотношением $A_i = \gamma_i \gamma_i^* - \rho_i^2$.

4. Эксперимент. Структурная формула исследуемого образца металлической сверхрешетки $\text{Al}_2\text{O}_3//\text{Cr}(100 \text{ \AA})/[\text{Fe}(90 \text{ \AA})/\text{Cr}(11 \text{ \AA})]_{\times 12}/\text{Gd}(50 \text{ \AA})/\text{Cr}(50 \text{ \AA})$. Поверхность подложки совпадает с кристаллографической плоскостью $(1\bar{1}02)$. Элемент структуры $\text{Gd}(50 \text{ \AA})/\text{Cr}(50 \text{ \AA})$ выступал в качестве опорного слоя. Слой хрома использовался для защиты слоя гадолиния от окисления. Образец был синтезирован на установке магнетронного распыления ULVAC (Институт физики металлов Уральского отделения РАН, г. Екатеринбург). Базовое давление в камере роста составляло $6 \cdot 10^{-7}$ Па, давление аргона — 0.1 Па, температура комнатная, внешнее магнитное поле отсутствовало.

Эксперименты по поляризационной нейтронной рефлектометрии проводились на времяпролетном нейтронном рефлектометре РЕМУР [12], установленном на импульсном ядерном реакторе ИБР-2 (Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Московская обл.). Внешнее магнитное поле прикладывалось вдоль поверхности образца, т. е. в плоскости слоев. Перед началом измерений образец был намагничен до насыщения в поле напряженностью примерно 5 кЭ, затем напряженность поля была плавно уменьшена до 24 Э, что является минимальным ведущим полем установки. В нем и проводились рефлектометрические измерения.

Поляризованный пучок формируется нейтронно-оптической системой рефлектометра, направление спина изменяется с помощью адиабатических радиочастотных спин-флипперов. Для анализа поляризации отраженного пучка используется верный зеркальный анализатор. Рефлектометрическая картина регистрируется двухкоординатным позиционно-чувствительным газовым детектором. Также осуществляется развертка по длинам волн нейтронов. Измерения проводились при трех различных углах падения: 4.2, 6.0 и 8.8 мрад.

5. Результаты и их анализ. На полученных в результате эксперимента картинах отражения нейтронов для различных поляризаций обнаружилось существенное диффузное рассеяние. Наиболее ярким оно оказалось в каналах с переворотом спина «+–» и «–+». Интенсивность отражения в этих каналах определяется только магнитной структурой образца и связано с неколлинеарным упорядочением магнитных моментов. В меньшей степени она зависит от химического состава, атомного строения и шероховатости поверхности и интерфейсов. Следовательно, наблюдаемое диффузное рассеяние имеет магнитную природу и, по-видимому, обусловлено появлением вертикальных магнитных доменов в образце, в каждом из которых моменты упорядочиваются неколлинеарным образом [5].

На рис. 1 представлена зависимость интенсивности магнитного диффузного рассеяния от величины внешнего магнитного поля. Вдоль осей отложены номера каналов детектора, которые могут быть пересчитаны в угол отражения (вертикальная

ось) и длину волны отраженных нейтронов (горизонтальная ось). Их абсолютные значения здесь не принципиальны, поскольку рисунок приведен с целью показать наличие диффузного рассеяния, которое можно увидеть только на двумерной картине. С увеличением поля интенсивность этого незеркального рассеяния ослабевает и практически полностью исчезает при 1,8 кЭ. В более сильных полях моменты упорядочиваются ферромагнитно. Таким образом, изменение диффузного рассеяния отражает процесс перематничивания слоистого антиферромагнетика.

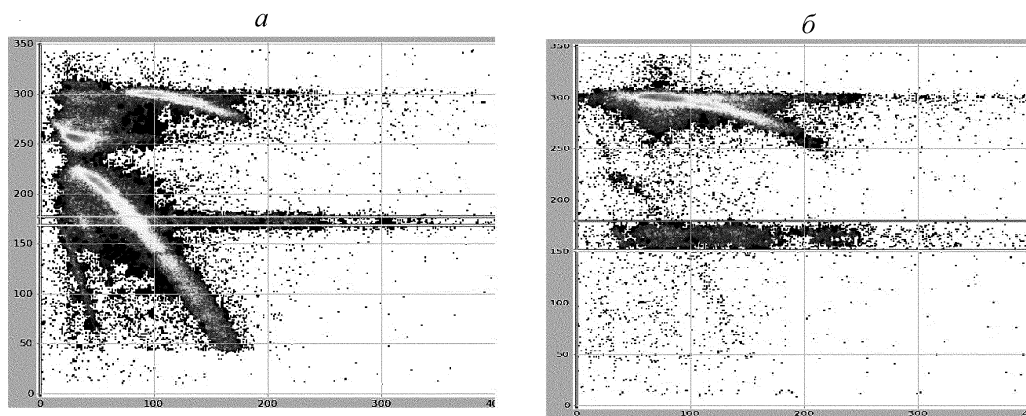


Рис. 1. Картина рассеяния поляризованных нейтронов от сверхрешетки Fe/Cr во внешнем поле 24 Э (а) и 1,8 кЭ (б)

Линиями выделена область зеркального рассеяния, яркие пятна сверху — след прямого пучка.

Для уточнения характеристик атомной и магнитной структур был проведен анализ зеркального отражения каналов рассеяния «++» и «--». Проводилась обработка одновременно двух рефлектометрических кривых для разных поляризаций, снятых при угле падения 8,8 мрад. Параметры варьировались с использованием алгоритма Левенберга — Марквардта, для расчета интенсивности применялся метод фазово-амплитудных функций, адаптированный для учета взаимодействия поляризованных нейтронов с магнитными моментами атомов образца. Степень несоответствия экспериментальной и расчетной кривых составила 4 % для обеих поляризаций, удовлетворительно описаны все особенности, включая двойной брэгговский пик ($q \approx 0.03 \text{ \AA}^{-1}$) на кривой «++». Результат представлен на рис. 2.

Так как изучаемый образец содержит слой Gd, у которого плотность длины рассеяния существенно зависит от энергии падающих нейтронов, экспериментальные данные были обработаны методом опорного слоя. Используя этот подход, были определены комплексные коэффициенты отражения для различных поляризаций для исследуемой части системы $\text{Al}_2\text{O}_3 // \text{Cr}(100 \text{ \AA}) / [\text{Fe}(90 \text{ \AA}) / \text{Cr}(11 \text{ \AA})]_{\times 12}$.

Следующим шагом было проведено уточнение характеристик отдельных слоев (толщина, ядерная и магнитная плотности длин рассеяния, шероховатость границ, направление магнитных моментов) так, чтобы обеспечить наиболее оптимальное соответствие одновременно модулей и фаз комплексных коэффициентов отражения для каналов рассеяния «++» и «--». На рис. 3, I и II показано сравнение экспериментальных данных и результатов расчетов.

Можно отметить, что результаты расчета для канала рассеяния «--» лучше совпадают с экспериментальными данными, чем для канала «++». В частности, фа-

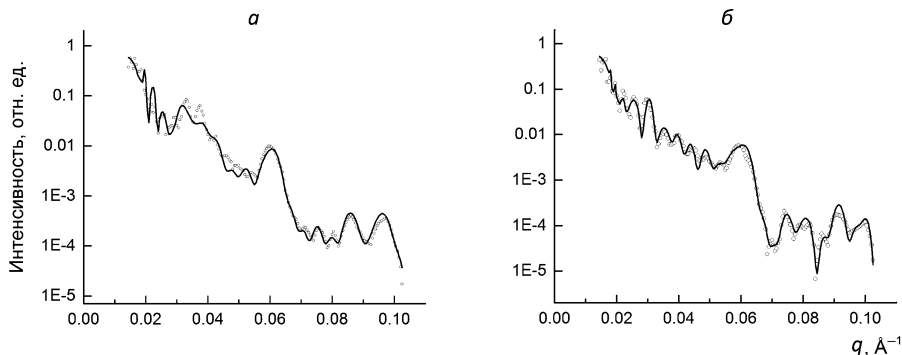


Рис. 2. Результаты обработки экспериментальных рефлектометрических кривых для каналов зеркального рассеяния «++» (а) и «--» (б)
Точки — эксперимент, линия — расчет.

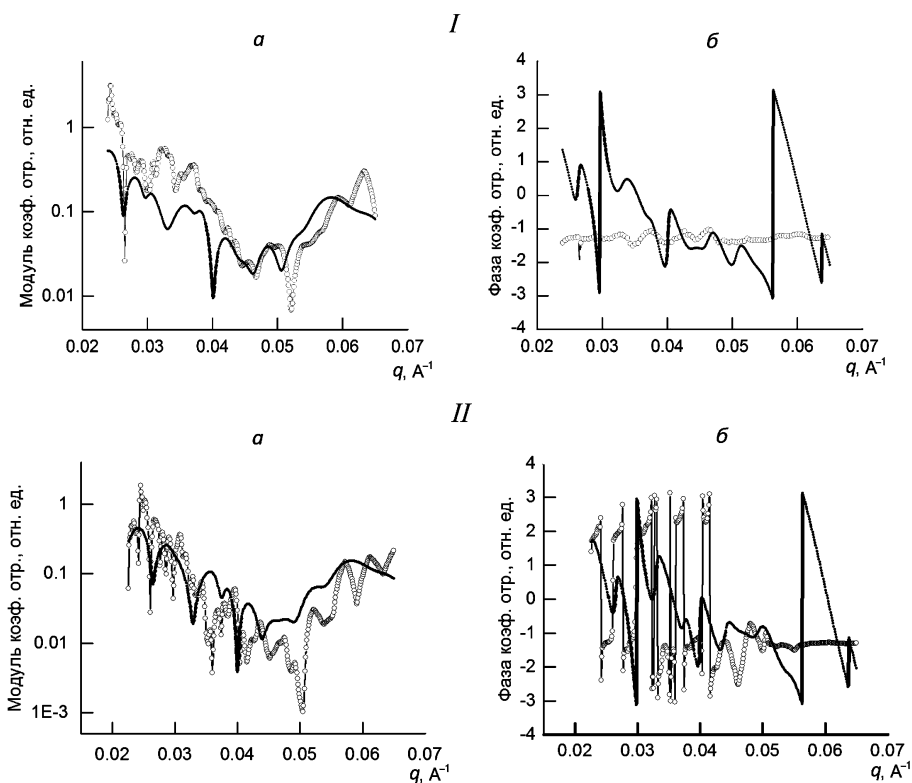


Рис. 3. Модули (а) и фазы (б) коэффициентов отражения для каналов рассеяния «++» (I) и «--» (II)
Точки — эксперимент, линия — расчет.

за «++» представляет собой почти константу со слабовыраженными осцилляциями. При этом на исходных данных — зависимостях $I(q)$ — также наблюдается уменьшение амплитуд осцилляций Кизиха, например по сравнению с кривой «--» (рис. 4). Это может быть связано с наличием поликристаллической структуры в исследуемом

образце. Но тогда интерференция лучей, отраженных от различных кристаллитов, привела бы к полному исчезновению особенностей на кривых фаз коэффициентов отражения для всех поляризаций, как в описанном в [13] случае.

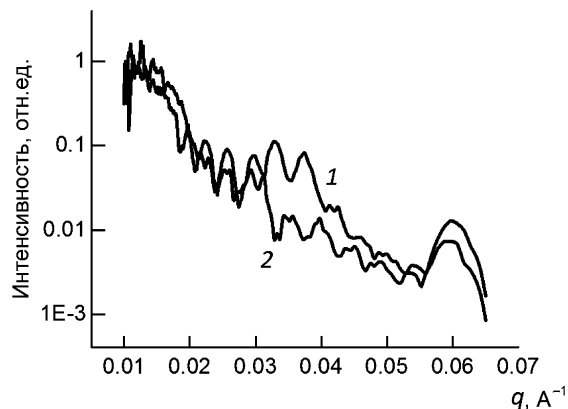


Рис. 4. Рефлектометрические кривые для каналов рассеяния «++» (1) и «--» (2) для угла падения 8.8 мрад

Возможной причиной уменьшения амплитуд осцилляций является возникновение магнитной доменной структуры в образце, которая влияет и на интерференционные эффекты. Тот факт, что совпадения для фаз в целом получились хуже, чем для модулей, объясняется большей чувствительностью фазы к характеристикам образца и, следовательно, к неточностям в их определении.

В результате обработки экспериментальных данных методом фазово-амплитудных функций и методом опорного слоя были получены структуры исследуемого образца: $\text{Al}_2\text{O}_3//\text{Cr}(133 \text{ \AA})/[\text{Fe}(94 \text{ \AA})/\text{Cr}(10 \text{ \AA})]_{12}/\text{Gd}(53 \text{ \AA})/\text{Cr}(25 \text{ \AA})/\text{Cr}_2\text{O}_3(24 \text{ \AA})$ и $\text{Al}_2\text{O}_3//\text{Cr}(86 \text{ \AA})/[\text{Fe}(94 \text{ \AA})/\text{Cr}(13 \text{ \AA})]_{12}/\text{Gd}(50 \text{ \AA})/\text{Cr}(25 \text{ \AA})/\text{Cr}_2\text{O}_3(25 \text{ \AA})$ соответственно. Совпадение толщин для двух методов достаточно хорошее. Наблюдается расхождение для буферного слоя Cr, что, по-видимому, можно объяснить различными результатами по шероховатости подложки в двух методах. Во втором случае шероховатость между подложкой и буферным слоем Cr получилась больше, что привело к меньшей толщине чистого слоя.

Значения углов (в градусах) между моментами соседних слоев Fe приведены в таблице. Углы отклонения магнитного момента от направления внешнего магнитного поля для исследуемой системы показаны на рис. 5.

Анализ параметров, полученных двумя методами, показывает, что слабое внешнее поле немного нарушило антиферромагнитное упорядочение магнитных моментов слоев Fe. Углы между моментами соседних слоев неодинаковы и лежат в диапазоне от 140 до 180°. Такое упорядочение можно условно рассматривать как геликоидальное с нерегулярным шагом. Суммарный магнитный момент сверхрешетки близок к нулю. Это соответствует предсказанию в работе [4], где показано, что для слоистого антиферромагнетика с малым числом слоев в слабом поле должно реализоваться спиральное состояние. Кроме того, наличие сильного диффузного рассеяния свидетельствует о том, что уже в слабых полях возникает разбиение образца на магнитные домены.

Таблица. Значения углов (в град) между моментами соседних слоев Fe, полученные разными методами

Номера слоев	Метод опорного слоя	Прямой расчет
1-2	174	173
2-3	180	145
3-4	179	143
4-5	179	153
5-6	178	173
6-7	179	173
7-8	178	154
8-9	177	156
9-10	178	162
10-11	180	134
11-12	177	174

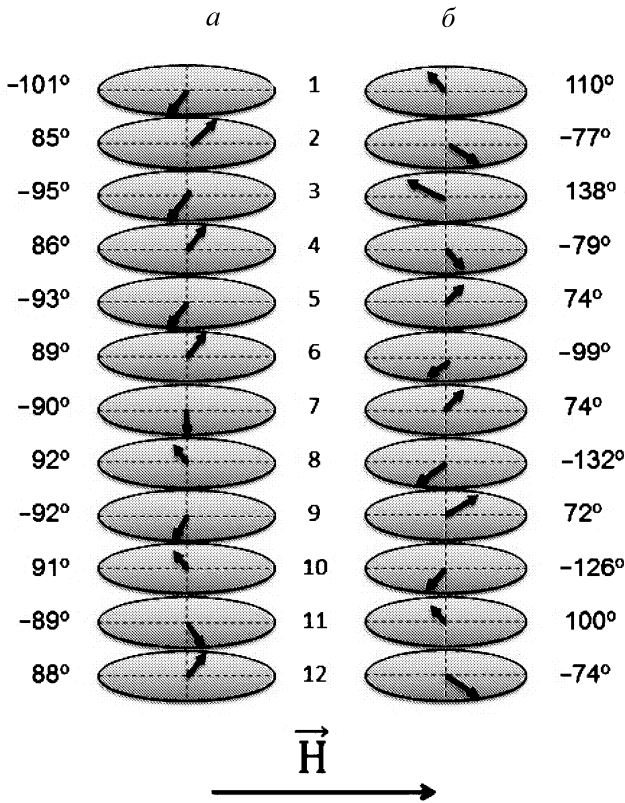


Рис. 5. Углы отклонения магнитного момента в каждом слое железа 1-12 от направления внешнего магнитного поля, рассчитанные методом опорного слоя (а) и методом фазово-амплитудных функций (б)

Косвенным доказательством наличия доменной структуры является тот факт, что два различных метода обработки экспериментальных данных показали два набора углов отклонения магнитных моментов, которые отличаются друг от друга примерно на 180° . Можно предположить, что эти наборы соответствуют двум типам магнитных доменов.

При увеличении внешнего поля антиферромагнитное обменное взаимодействие будет преодолеваться и моменты слоев начнут сильнее отклоняться в направлении внешнего поля, возникнет ненулевой суммарный момент. Геликоидальное упорядочение перейдет в веерное с переменными углами между моментами, что и наблюдалось на близкой по характеристикам сверхрешетке в более высоком поле [5].

6. Заключение. В данной работе показано, что неколлинеарное упорядочение начинает формироваться в сверхрешетках типа Fe/Cr уже в достаточно слабых внешних магнитных полях (от 24 Э). При этом в образце возникают магнитные домены с противоположным направлением вращения моментов, доменная структура проявляет себя интенсивным диффузным рассеянием в канале с переворотом спина. Слабое магнитное поле начинает разрушать антиферромагнитное упорядочение, которое переходит сначала в спиральное с большим углом поворота, близким к 180° , затем в веерное и в больших полях в ферромагнитное. Такое поведение согласуется с теоретическими и экспериментальными исследованиями похожих систем, проведенными другими авторами. Приведенные результаты были получены двумя различными методами: прямой обработкой и восстановлением комплексного коэффициента отражения. Качественный анализ данных дал похожие результаты, хотя математически методы отличаются друг от друга. Количественные различия главным образом связаны с тем, что в представленных методах используются разные наборы входных данных. В методе фазово-амплитудных функций обрабатывается рефлектометрическая кривая для одного угла на достаточно широком диапазоне q . В методе опорного слоя анализируются данные, полученные на трех различных углах, но в меньшем диапазоне по q .

Авторы благодарят В. Д. Жакетова и Ю. В. Никитенко (Объединенный институт ядерных исследований, Дубна) за помощь в постановке эксперимента.

Литература

1. Baibich M. N., Broto J. M., Fert A., Nguyen Van Dau F., Petroff F., Etienne P., Creuzet G., Friederich A., Chazelas J. Giant magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr magnetic superlattices // *Physical Review Letters*. 1988. Vol. 61. Iss. 21. P. 2472–2475.
2. Binash G., Grunberg P., Saurenbach F., Zinn W. Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange // *Physical Review B*. 1989. Vol. 39. Iss. 7. P. 4828–4830.
3. Куранов Д. Ю., Андреева Т. А., Бедрина М. Е. Расчет потенциала ионизации фталоцианинатов цинка и графена на поверхности диэлектриков // *Вестник Санкт-Петербургского университета. Прикладная математика. Информатика. Процессы управления*. 2022. Т. 18. Вып. 1. С. 52–62. <https://doi.org/10.21638/11701/spbu10.2022.104>
4. Ustinov V. V. Spin-flop transition scenario in finite layered antiferromagnets // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2007. Vol. 310. Iss. 2. P. 2219–2221.
5. Lauter-Pasyuk V., Lauter H., Toperverg B., Romashev L., Ustinov V. Transverse and lateral structure of the spin-flop phase in Fe/Cr antiferromagnetic superlattices // *Physical Review Letters*. 2002. Vol. 89. Iss. 16. P. 167203.
6. Бабинов В. В. Метод фазовых функций в квантовой механике. М.: Наука, 1976. 288 с.
7. Lekner J. Theory of reflection of electromagnetic and particle waves. Dordrecht: Springer Science+Business Media, 1987. 281 p.
8. Zimmerman K. M. Advanced analysis techniques for X-ray reflectivities: theory and application: doctoral dissertation in chemistry. Karlsruhe: University of Dortmund, 2005. 190 p.
9. De Haan V. O., van Well A. A., Sacks P. E., Adenwalla S., Felcher G. P. Toward the solution of the inverse problem in neutron reflectometry // *Physica B: Physics of Condensed Matter*. 1996. Vol. 221. Iss. 1–4. P. 524–532.
10. Lynn J. E., Seeger P. A. Resonance effects in neutron scattering lengths of rare-earth nuclides // *Atomic Data and Nuclear Data Tables*. 1990. Vol. 44. Iss. 2. P. 191–207.

11. *Nikova E. S., Salamatov Yu. A., Kravtsov E. A., Bodnarchuk V. I., Ustinov V. V.* Experimental determination of gadolinium scattering characteristics in neutron reflectometry with reference layer // *Physica B: Physics of Condensed Matter*. 2019. Vol. 552. P. 58–61.

12. *Aksenov V. L., Lauter-Pasyuk V. V., Lauter H., Nikitenko Yu. V., Petrenko A. V.* Polarized neutrons at pulsed sources in Dubna // *Physica B: Physics of Condensed Matter*. 1996. Vol. 335. Iss. 1–4. P. 147–152.

13. *Nikova E. S., Salamatov Yu. A., Kravtsov E. A., Ustinov V. V.* Application of a Gd reference layer for the study of magnetic metallic nanostructures by neutron reflectometry // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2021. Vol. 15. N 5. P. 899–902.

Статья поступила в редакцию 27 июля 2022 г.

Статья принята к печати 1 сентября 2022 г.

Контактная информация:

Саламатов Юрий Александрович — канд. физ.-мат. наук; salamatov@imp.uran.ru

Никова Екатерина Сергеевна — nikova@imp.uran.ru

Девятериков Денис Игоревич — devidor@imp.uran.ru

Кравцов Евгений Алексеевич — д-р физ.-мат. наук; kravtsov@imp.uran.ru

Recovering complex reflection coefficient using the reference layer algorithm for multilayer systems with non-collinear magnetic ordering*

Yu. A. Salamatov, E. S. Nikova, D. I. Devyaterikov, E. A. Kravtsov

M. N. Mikheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences, 18, ul. Sofii Kovalevskoy, Ekaterinburg, 620137, Russian Federation

For citation: Salamatov Yu. A., Nikova E. S., Devyaterikov D. I., Kravtsov E. A. Recovering complex reflection coefficient using the reference layer algorithm for multilayer systems with non-collinear magnetic ordering. *Vestnik of Saint Petersburg University. Applied Mathematics. Computer Science. Control Processes*, 2022, vol. 18, iss. 4, pp. 583–595. <https://doi.org/10.21638/11701/spbu10.2022.412> (In Russian)

This work analyzes two mathematical algorithms for processing experimental curves in polarized neutron reflectometry, one of which makes it possible to determine the complex reflection coefficient. The approbation was carried out for a Fe/Cr type superlattice with an irregular non-collinear ordering of the magnetic moments of the Fe layers. The processing of the experiment was carried out both by direct refinement of the structure parameters and by the method of calculating the module and phase of the reflectometry signal using the Gd reference layer. The results obtained with different methods are compared with each other. To clarify the structural and magnetic characteristics, the Levenberg – Marquardt algorithm was applied in both cases. The obtained data on the magnetic structure is in agreement with the theoretical model of magnetization of a layered antiferromagnet of finite dimensions in a weak field. The presented modification of the reference layer method can be considered as the phase problem solution in polarized neutron reflectometry.

Keywords: polarized neutron reflectometry, phase-amplitude function method, Runge – Kutta method, complex reflection coefficient, multilayer nanoheterostructures, phase problem, non-collinear magnetic ordering, reference layer, Levenberg – Marquardt algorithm.

* The research was carried out within the state assignment of Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme “Spin” N 22021000036-3), neutronographic experiments was carried out with the financial support of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, Agreement N 075-15-2022-830 dated May 27, 2022 (continuation of Agreement N 075-15-2021-1358 dated October 12, 2021).

References

1. Baibich M. N., Broto J. M., Fert A., Nguyen Van Dau F., Petroff F., Etienne P., Creuzet G., Friederich A., Chazelas J. Giant magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr magnetic superlattices. *Physical Review Letters*, 1988, vol. 61, iss. 21, pp. 2472–2475.
2. Binasch G., Grunberg P., Saurenbach F., Zinn W. Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange. *Physical Review B*, 1989, vol. 39, iss. 7, pp. 4828–4830.
3. Kuranov D. Yu., Andreeva T. A., Bedrina M. E. Raschet potentsiala ionizatsii ftalocianinatom cinka i grafena na poverhnosti dielektrikov [Calculation of the ionization potential of zinc and graphene phthalocyaninates on the surface of dielectrics]. *Vestnik of Saint Petersburg University. Applied Mathematics. Computer Science. Control Processes*, 2022, vol. 18, iss. 1, pp. 52–62. <https://doi.org/10.21638/11701/spbu10.2022.104> (In Russian)
4. Ustinov V. V. Spin-flop transition scenario in finite layered antiferromagnets. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2007, vol. 310, iss. 2, pp. 2219–2221.
5. Lauter-Pasyuk V., Lauter H., Toperverg B., Romashev L., Ustinov V. Transverse and lateral structure of the spin-flop phase in Fe/Cr antiferromagnetic superlattices. *Physical Review Letters*, 2002, vol. 89, iss. 16, p. 167203.
6. Babikov V. V. *Metod fazovykh funktsiy v kvantovoy mekhanike* [Phase function method in quantum mechanics]. Moscow, Nauka Publ., 1976, 288 p. (In Russian)
7. Lekner J. *Theory of reflection of electromagnetic and particle waves*. Dordrecht, Springer Science+Business Media Publ., 1987, 281 p.
8. Zimmerman K. M. *Advanced analysis techniques for X-ray reflectivities: theory and application*. Doctoral dissertation in chemistry. Karlsruhe, University of Dortmund Press, 2005, 190 p.
9. De Haan V. O., van Well A. A., Sacks P. E., Adenwalla S., Felcher G. P. Toward the solution of the inverse problem in neutron reflectometry. *Physica B: Physics of Condensed Matter*, 1996, vol. 221, iss. 1–4, pp. 524–532.
10. Lynn J. E., Seeger P. A. Resonance effects in neutron scattering lengths of rare-earth nuclides. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 1990, vol. 44, iss. 2, pp. 191–207.
11. Nikova E. S., Salamatov Yu. A., Kravtsov E. A., Bodnarchuk V. I., Ustinov V. V. Experimental determination of gadolinium scattering characteristics in neutron reflectometry with reference layer. *Physica B: Physics of Condensed Matter*, 2019, vol. 552, pp. 58–61.
12. Aksenov V. L., Lauter-Pasyuk V. V., Lauter H., Nikitenko Yu. V., Petrenko A. V. Polarized neutrons at pulsed sources in Dubna. *Physica B: Physics of Condensed Matter*, 1996, vol. 335, iss. 1–4, pp. 147–152.
13. Nikova E. S., Salamatov Yu. A., Kravtsov E. A., Ustinov V. V. Application of a Gd reference layer for the study of magnetic metallic nanostructures by neutron reflectometry. *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 2021, vol. 15, no. 5, pp. 899–902.

Received: July 27, 2022.

Accepted: September 01, 2022.

Authors' information:

Yuri A. Salamatov — PhD in Physics and Mathematics; salamatov@imp.uran.ru

Ekaterina S. Nikova — nikova@imp.uran.ru

Denis I. Devyaterikov — devidor@imp.uran.ru

Evgeny A. Kravtsov — Dr. Sci. in Physics and Mathematics; kravtsov@imp.uran.ru